

Отзыв

на автореферат диссертационной работы Мельникова Игоря Никитича «Кинетика и механизм термического разложения нитро и нитраминопроизводных гетероциклических соединений по данным термического анализа и высокоточных квантовохимических расчетов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Мельникова Игоря Никитича посвящена исследованию термохимических свойств различных гетероциклических соединений. Цель исследования – определение термических и термохимических параметров для реакций разложения производных имидазола, гликурила, пиридина и т.п. Актуальность выбранной темы не вызывает сомнений ввиду востребованности энергетических материалов на основе гетероаннелированных соединений. С этой точки зрения получение новых данных о термических свойствах гетероциклических C- и N-нитросоединений является важным этапом на пути создания эффективных технологий для производства энергетических материалов.

Из автореферата видно, что для достижения поставленных задач была проведена серьезная научная работа, которая включает в себя использование экспериментальных методов термогравиметрии, сканирующей калориметрии и теоретических методов квантовой химии. В рамках работы построены кинетические модели термического разложения широкого ряда соединений, проведены квантово-химические расчеты для реакций разложения, получены кинетические и термохимические параметры реакций и их участников, установлены наиболее вероятные вторичные реакционные пути разложения, предложен метод оценки энтальпии образования и сублимации энергетических материалов.

Полученные в данной работе результаты имеют важное практическое значение и являются новыми. Цель исследования, на мой взгляд, была достигнута, а все его задачи – решены. Представленная работа выполнена на высоком научном уровне с использованием современных экспериментальных и теоретических методов. Можно отметить, что данная работа представляет собой отличный пример того, как должны проводиться исследования подобного рода в области исследования кинетики и механизма реакций.

При ознакомлении с авторефератом возникли следующие вопросы.

1. Учитывался ли эффект неполноты базисного набора (basis set superposition error) при проведении квантово-химических расчетов методом DLPNO-CCSD(T)?
2. Почему для квантово-химических расчетов был выбран метод DLPNO-CCSD(T), а не, например, CCSD(T)-F12? Чем обусловлен выбор функционала плотности M06-2X?

В заключении можно отметить, что приведенные вопросы не снижают общего положительного впечатления от диссертационной работы и не затрагивают ее основных выводов и результатов. По своей актуальности, объему, достоверности, научной новизне и практической значимости полученных результатов работа Мельникова Игоря Никитича соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, отвечает требованиям пп. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842 (в действующей редакции), предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор диссертационной работы, Мельников Игорь Никитич, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Информация о лице, составившем отзыв:

Старший научный сотрудник,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», Отдел физико-химических методов исследования,
Пр-т Академика Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия, 630090,
тел.: +7(383)330-80-56, gabrienko@catalysis.ru,
кандидат химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия



Антон Алексеевич Габриенко

14 мая 2026 г.

Я, Антон Алексеевич Габриенко, даю согласие на обработку моих персональных данных в документах, связанных с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела И. Н. Мельникова



Антон Алексеевич Габриенко

Подпись А. А. Габриенко заверяю

Ю. В. Дубинин
Ученый секретарь ИК СО РАН, канд. хим. наук

